

**Расчет колебательных спектров графеновых нанолент**  
**Пономарев Владислав Валерьевич**  
Северо-Восточный федеральный университет им. М. К. Аммосова  
Шарин Егор Петрович, к.ф.-м.н.  
[pon\\_slav@mail.ru](mailto:pon_slav@mail.ru)

Исследования графеновых нанолент (GNR) с помощью сканирующей зондовой микроскопии и спектроскопии подтвердили тесную связь между структурой и свойствами, предоставляя структурную и электронную информацию в атомном масштабе. Однако поверхностный синтез атомарно точных графеновых нанолент является лишь первым шагом к интеграции GNR в нанoeлектронные устройства, за которым должен следовать их контролируемый перенос с металлической ростовой подложки (обычно Au (111)) на изолирующую или полупроводниковую подложки, которые более подходят для приложений цифровой логики.

Однако интеграция GNR в нанoeлектронные устройства является критическим этапом, поскольку необходимо сохранять качество GNR и контролировать его после переноса на подложку. Рамановская спектроскопия является пока единственным методом, способным исследовать структурное качество GNR на всем пути от роста в условиях сверхвысокого вакуума (UHV) до интеграции в нанoeлектронные устройства.

В данной работе на основе метода функционала плотности исследуются колебательные свойства графеновых нанолент. края которых пассивированы атомами водорода. Расчеты проводились в рамках теории функционала плотности с использованием приближения локальной плотности (LDA). Для ускорения сходимости в расчетах выбрана величина энергии «обрезания»  $E_{cut}=40$  Ry подобно расчетной процедуре, изложенной в работе [2]. Разбиение обратного пространства на сетку  $5 \times 5 \times 1$  осуществлялось посредством использования метода Монхорста-Пака [3]. Во избежание взаимодействия между слоями расстояние между ними устанавливалось равным  $15 \text{ \AA}$ .

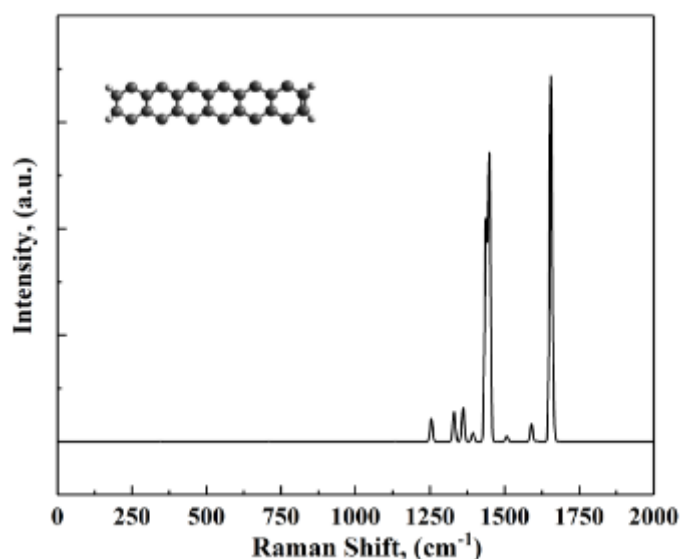


рис. 1

На рис.1 показан спектр комбинационного рассеяния графеновой наноленты с краями типа «кресло» шириной  $N=7$  (7-AGNR), рассчитанный методами функционала плотности. В работе показано, что в графеновых нанолентах с различной шириной характерные сигнатуры однослойного графена в спектрах комбинационного рассеяния все еще хорошо сохраняются, что абсолютные интенсивности G- и 2D-линий масштабируются с шириной наноленты, а интенсивность D-линии - нет. Следовательно, интенсивность D-линии зависит только от краевой области наноленты, включая шероховатость кромки, которая может быть дополнительно проанализирована путем выполнения зависимых от поляризации измерений.

Из рисунка видно, в наноленте 3-ASiNR характерные сигнатуры подобные для однослойного графена в спектре комбинационного рассеяния все еще хорошо сохраняются.

Список публикаций:

- [1] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et. al., *J. Phys.: Condens. Matter* 21, 1-19 (2009).
- [2] S. Lebegue *Phys. Rev. B* 79, 115409-115412 (2009).
- [3] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, *Phys. Rev. B* 13, 5188–5192 (1976).